I－5．液体金属のDynamical Structure Factor

原子力研（東海）　千原順三

液体金属は，ion と electron の mixture であり，electron は Fermi 縮退を起しているので量子効果は無視できない。これを取扱うために，先ずHartree equation の一般化を行い，次いでこれを binary quantum mixture に拡張する。

Mori の方法に従うと，

$$\rho_{k,Q} \equiv a^{+}_{k+Q}\, a_k ,\quad [a^{+}_{k},\ a_k,\ \text{creation, annihilation op.}]$$

についての relaxation function，$\Lambda_Q^{k,k'}(z)$ は次のようになる。

$$\Lambda_Q^{k,k'}(z) \equiv \int_0^{\infty} e^{-zt} \langle \rho_{k,Q}(t) ; \rho_{k'Q} \rangle dt$$

$$= \sum_{k''} (k | \{ z - i\omega_0 + \varphi(z) \}^{-1} | k'') \chi_Q^{k'',k'} \tag{1}$$

ここで，

$$\langle A : B \rangle \equiv \beta^{-1} \int_0^{\beta} \langle e^{\lambda H} A e^{-\lambda H} B^{t} \rangle d\lambda ,\quad \beta^{-1} \equiv k_B T ,$$

$$(k | i\omega_0 | k') \equiv \sum_{k''} \langle \dot{\rho}_{k,Q} : \rho_{k'',Q} \rangle [\langle \rho_{k'',Q} : \rho_{k'Q} \rangle]^{-1} ,$$

$(k | A | k')$：matrix A の (k, k') element.

$\varphi(t)$： damping function ,

ここでは $\varphi(z)=0$ の近似を用いる。$\chi_Q^{k,k'}$ を求めることは困難なので次の3条件を満たすように仮定する。

1), interactionがない時はfree particleの$\chi_{Q}^{0\mathbf{k},\mathbf{k}'}$になる。

$$\chi_{Q}^{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \chi_{Q}^{0\mathbf{k},\mathbf{k}'} \equiv \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\, f_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) \text{ ,} \quad \text{ここで}$$

$$f_{Q}(\mathbf{k}) = (n_{k+Q} - n_{k}) / (-\beta\hbar\omega^{0}_{k,Q}),$$

$$\hbar\omega^{0}_{k,Q} \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}$$

$$n_{\mathbf{k}} = 1/(e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)} - \eta), \quad \eta = +1 \text{ (boson)}, -1 \text{ (fermion)}$$

2), $\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \chi_{Q}^{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \langle \rho_{-\mathbf{Q}} : \rho_{\mathbf{Q}} \rangle \equiv \chi_{Q}$

3), $\lim_{\hbar \to 0} \chi_{Q}^{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\, f_{M}(\mathbf{k}) + f_{M}(\mathbf{k})\, f_{M}(\mathbf{k}')\{S(Q) - 1\}$

ここで，$f_{M}(\mathbf{k})$は Maxwell分布，$S(Q) \equiv \langle \rho_{\mathbf{Q}} \rho_{-\mathbf{Q}} \rangle$

この3条件より$\chi_{Q}^{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$を次のように仮定する。

$$\chi_{Q}^{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \langle \rho_{k,Q} : \rho_{k',Q} \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\, f_{Q}(\mathbf{k}) + f_{Q}(\mathbf{k})\, f_{Q}(\mathbf{k}')\{\chi_{Q}/\chi_{Q}^{0} - 1\}/\chi_{Q}^{0} \tag{2}$$

ここで，$\chi_{Q}^{0} = \sum_{\mathbf{k}} f_{Q}(\mathbf{k}) = (-\beta^{-1}) \sum_{\mathbf{k}} \{n_{k+Q} - n_{k}\} / (\varepsilon_{k+Q} - \varepsilon_{k})$,

また一方次式が容易に得られる。

$$\langle \dot{\rho}_{k,Q} : \rho_{k',Q} \rangle = (-i\beta^{-1}\hbar^{-1})\,[n_{k+Q} - n_{k}] \equiv g_{Q}(\mathbf{k}) \tag{3}$$

(2) 式と(3)式より,

$$(\mathbf{k}|\,i\,\omega_0\,|\mathbf{k}') = \frac{i}{\hbar}\,\omega^0_{k,Q}\,\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

$$-\frac{1}{\beta}\left\{\frac{1}{\chi^0_Q}-\frac{1}{\chi_Q}\right\}\frac{i}{\hbar}\,[n_{k+Q}-n_k]$$

(4)

これから次の generalized Hartree equation を得る。

$$\dot{\rho}_{kQ} = (z - i\,\omega^0_{k,Q})\,\rho_{k,Q}$$

$$-\frac{1}{\beta}\left\{\frac{1}{\chi^0_Q}-\frac{1}{\chi_Q}\right\}\frac{i}{\hbar}\{n_{k+Q}-n_k\}\sum_k \rho_{k',Q}$$

これは普通の Hartree equation と比べて,

$$V_{eff}(Q) = -\frac{1}{\beta}\left\{\frac{1}{\chi^0_Q}-\frac{1}{\chi_Q}\right\}$$

となっている点で異る。(4) 式を用いると,(1) 式は次のようになる。

$$\Lambda^{\mathbf{k},\mathbf{k}'}_Q\,[z] = \frac{1}{z}\left\{\chi^{\mathbf{k},\mathbf{k}'}_Q - \chi^{\mathbf{k}\mathbf{k}'}_Q\,[z]\right\},$$

$$\chi^{\mathbf{k},\mathbf{k}'}_Q\,[z] \equiv \int_0^\infty e^{-zt} < [\rho_{k,Q}\,;\,\rho^+_{k',Q}] > dt$$

$$= \frac{g_Q(\mathbf{k})}{\Lambda(z,k)} + V_{eff}\,\frac{g_Q(\mathbf{k})}{\Lambda(z,\mathbf{k})}\cdot\frac{1}{\varepsilon(Q,z)}\cdot\frac{g_Q(\mathbf{k}')}{\Lambda(z,\mathbf{k}')}$$

(5)

ここで, $\Lambda(z,k) = z - i\,\omega^0_{k,Q}$

$$\varepsilon(Q,z) = 1 - V_{eff}\sum_{\mathbf{k}}\frac{g_Q(\mathbf{k})}{\Lambda(\mathbf{k})}$$

これから,

$$S(Q,\omega)=\frac{\beta\hbar\omega}{2}\{1+\coth\frac{\beta\hbar\omega}{2}\}\Gamma_Q(\omega),$$

$$\Gamma_Q(\omega)\equiv\mathrm{Re}\left[\sum_{k,k'}\Lambda_Q^{kk'}(i\omega)\right]=\frac{1}{\omega}\frac{1}{V_{eff}}\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\varepsilon(Q,i\omega)}\right\}$$

(6)

dispersion relation は，$\varepsilon_{Q,z}=0$，より

$$\Omega_Q^2=\frac{Q^2}{m\beta}\left\{\frac{1}{\chi_Q}-\frac{1}{\chi_Q}\right\} \qquad (7)$$

i)，classical な場合は，$\chi_Q^0=1$，$\chi_Q=S(Q)$ だから，

$$\Omega_Q^2=\frac{Q^2}{m\beta}\left\{\frac{1}{S(Q)}-1\right\}$$

ii)，quantal な場合は，$\Gamma_Q(\omega)=\chi_Q\{\delta(\omega-\Omega_Q)+\delta(\omega+\Omega_Q)\}/2$

とすると，

$$\beta\chi_Q=S(Q)\Big/\frac{\hbar\Omega_Q}{2}\coth\frac{\beta\hbar\Omega_Q}{2}\cong S(Q)\Big/\frac{\hbar\Omega_Q}{2}$$

これを用いると，

イ)，Boson の場合，$\Omega_Q=\hbar Q^2/2mS(Q)$

ロ)，Fermion の場合，

$$\Omega_Q^2=\frac{Q^2}{m}\left\{\frac{\hbar}{2}\Omega_Q/S(Q)-\mathscr{G}(\varepsilon_F)W(Q/2k_F)\right\}$$

$$W(Q/2k_F)\equiv W(x)=\frac{1}{2}+\frac{1-x^2}{4x}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right|$$

以上の結果を，変数として，

$$a\equiv\left\|\begin{matrix}\rho_{k,Q}^{(1)}\\ \rho_{k,Q}^{(2)}\end{matrix}\right\|$$

をとり，Binary quantum systemに適用すると次の結果を得る。

$$\chi_{ii}^{kk'}(Q,z)\equiv\int_0^{\infty}e^{-tz}<[\rho_{\mathbf{k},Q}^{(i)},\rho_{\mathbf{k}',Q}^{(i)}(t)]>dt$$

$$=\frac{g_i\delta}{\Lambda_i}\mathbf{k},\mathbf{k}'+V_i^*(Q,z)\frac{g_i(\mathbf{k})}{\Lambda_i(\mathbf{k})}\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_i(Q,z)}\cdot\frac{g_i(\mathbf{k}')}{\Lambda_i(\mathbf{k}')} \tag{8}$$

$$S_{ii}(Q,\omega)=\frac{F_\beta(\omega)}{\omega}I_m\left[\frac{1}{V_i^*(Q,i\omega)}\left\{\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_i(Q,\omega)}-1\right\}\right] \tag{9}$$

$$S_{ij}(Q.\ \omega)=\frac{F_\beta(\omega)}{\omega}\ \frac{V_{12}}{V_1V_2}I_m\left[\frac{(\varepsilon_2-1)(\varepsilon_1-1)}{\varepsilon_1+\varepsilon_2-1}\right] \tag{10}$$

ここで，

$$\beta V_i=-[H_i+H_1H_2\chi_{\bar{i}}^0-H_{12}\chi_{\bar{i}}^0H_{12}]$$
$$\times[1+\chi_1^0H_1+\chi_2^0H_2+\chi_1^0H_1\chi_2^0H_2$$
$$-H_{12}\chi_1^0\chi_2^0]^{-1},$$

$\beta V_{ij}=-H_{12}/\Delta$ ：Δ は上式の第2因子（分母），$\bar{1}=2$，$\bar{2}=1$，

$$H_i=\{\chi_i(Q)/\chi_i^0(Q)-1\}/\chi_i^0(Q),$$
$$H_{ij}\equiv\chi_{ij}(Q)/\chi_i^0\chi_j^0,$$

$$\tilde{\varepsilon}_i(Q,z)=1-V_i^*(Q,Z)\sum_{\mathbf{k}}\frac{g_i}{\Lambda_i},$$
$$\varepsilon_i=1-V_i\sum_{\mathbf{k}}\frac{g_i}{\Lambda_i},$$

$$g_i=-\frac{1}{\beta}\ \frac{i}{\hbar}[n_{k+Q}^{(i)}-n_k^{(i)}],\quad \Lambda_j\equiv z-i\omega_{k,Q}^{(j)0}$$

$$V_i^* = V_i / \varepsilon_i(Q, z),$$

$$F_\beta(\omega) = \frac{\hbar\omega\beta}{2}\left\{1 + \coth\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right\}$$

この結果は ion−ion interaction が,

$$V^{I-I}_{eff} = V_{I-I} / \varepsilon_{elect}(Q.z)$$

で与えられ，さらに V_{I-I}，ε_{elect}が χ^I_Q，χ^e_Q の関数になっていることを示している。

$\varepsilon_e(Q, z) \cong \varepsilon_e(Q, 0)$ とすると,

$$\beta V^{I-I}_{eff} = \left\{\frac{1}{S(Q)} - 1\right\} \frac{1}{1 + \frac{4\pi e^2}{Q^2}\{1 - G(q)\}\chi^e_Q} + \frac{\chi^2_{I-e}(Q)}{S(Q)\chi^{0e}_Q},$$

$$G(q) \equiv -\frac{1}{n}\int \frac{qq'}{q'^2}\left[S_e(q - q') - 1\right]\frac{dq'}{(2\pi)^3} \cong \frac{1}{2}\frac{q^2}{q^2 + q_F^2}$$

$$\chi^{0e}_Q \equiv g(\varepsilon_F) \cdot W(Q/2k_F)$$

電子ガスのない場合の $\beta \hat{V}_{eff}(Q) = \frac{1}{S(Q)} - 1$，との違いがあらわれている。